



TITLE:

sd相互作用による束縛状態

AUTHOR(S):

中嶋, 貞雄

CITATION:

中嶋, 貞雄. sd相互作用による束縛状態. 物性研究 1968, 9(5): 331-342

ISSUE DATE:

1968-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/86157>

RIGHT:

sd 相互作用による束縛状態

中 嶋 貞 雄 (物性研)

(1月17日受理)

§ 1. Introduction

金属中におかれた1個の局在スピンと sd 交換相互作用している伝導電子系の束縛状態について, Yosida [1], [2], Okiji [3], Yoshimori [4] が展開した理論は, 弱結合の極限および絶対零度という条件のもとで, exact なものになっている。このことを, Green 関数とその摂動展開の方法を用いて*, 以下に示す。

§ 2. Green Function

Abrikosov [5] にしたがって, 局在スピンを Fermi 粒子で記述しよう。

$$\sum S_{\beta\beta'} a_{\beta}^+ a_{\beta'} \quad \text{-----} (2.1)$$

局在スピンの大きさは $1/2$ としておく。したがってスピン・ベクトル・マトリックス S は $S^2 = (3/4)$ をみたす。以下, a, a^+ によって消えたり生れたりする Fermi 粒子をかりに スピノン とよぶことにしよう。例によって sd 交換積分 J は定数, conduction band は $D > \xi_k > -D$ で一定の状態密度 ρ をもつとする。ただし ξ_k は自由電子ガスの Fermi 準位から測った一電子エネルギーである。

ハミルトニアンは次の形をとる。

$$H = H_0 + H_1 \quad \text{-----} (2.2)$$

$$H_0 = \sum \xi_k c_{k\alpha}^+ c_{k\alpha}$$

$$H_1 = - \left(\frac{J}{N} \right) \sum (\sigma_{\alpha\alpha'} \cdot S_{\beta\beta'}) c_{k\alpha}^+ a_{\beta}^+ a_{\beta'} c_{k'\alpha'}$$

ここに c, c^+ は電子を消したり作ったりするオペレータ, σ は Pauli のベクトル・マトリックスである。

さて，スピノンに関しては真空であり，電子に関しては N 個の電子からなる自由電子ガスの最低状態になっている状態 Φ_0 を考えよう。

$$a_\beta \Phi_0 = 0 \quad H_0 \Phi_0 = E_0(N) \Phi_0$$

ところで，スピノンの真空にたいして (2.1) はゼロであるから， Φ_0 は H_0 の固有関数であるばかりでなく，全ハミルトニアン (2.2) の固有関数でもある。

$$H \Phi_0 = E_0(N) \Phi_0 \quad \text{-----} (2.3)$$

そこで，この状態 Φ_0 に関して次のような exact Green 関数を定義する。

$$K(k\alpha\beta t, k'\alpha'\beta' t') \quad \text{-----} (2.4)$$

$$= \langle \Phi_0 | T C_{k\alpha}(t) A_\beta(t) A_{\beta'}^+(t') C_{k'\alpha'}^+(t') | \Phi_0 \rangle$$

T は Wick のオペレータ，大文字はハミルトニアン (2.2) で運動する Heisenberg オペレータである。

$$A_\beta(t) = e^{iHt} a_\beta e^{-iHt} \text{ etc.}$$

(2.4) の物理的意味は次の通りである。

まず $t > t'$ とすると

$$K = \langle \Phi_0 | c_{k\alpha} a_\beta e^{i(E_0(N)-H)(t-t')} a_{\beta'}^+ c_{k'\alpha'}^+ | \Phi_0 \rangle \quad \text{-----} (2.5)$$

これは，時刻 t' に自由電子ガスの Fermi sea に 1 個の電子と 1 個のスピンを inject したとき，この粒子対がどのように propagate してゆくかを記述する。ハミルトニアン H はスピノンの数を保存するから， t' から t まで，1 個しかもたて 1 個のスピンが運動する。したがって (2.5) にあらわれた H は，通常の sd ハミルトニアンと等価である。もちろん inject された粒子対は，sd 相互作用を通じて，おたがいを散乱するばかりでなく，electron-hole pair を励起する。

他方， $t < t'$ なら， Φ_0 はスピノンの真空であるので，(2.4) はゼロであ

る。したがって、Fourier 変換を

$$K(k\alpha\beta t, k'\alpha'\beta' t') \\ = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} K(k\alpha\beta, k'\alpha'\beta'; \omega) e^{-i\omega(t-t')} \quad (2.6)$$

で導入したとき、 $K(\omega)$ は複素 ω 平面の上半面で正則な解析関数である。これについて、(2.5)により、次のスペクトル表示がえられる。

$$K(\omega) = \sum_S \langle \Phi_0 | c\alpha | \Psi_S \rangle \langle \Psi_S | a^+ c^+ | \Phi_0 \rangle \\ \cdot [\omega - (W_S(N+1) - F_0(N)) + i0^+]^{-1} \quad (2.7)$$

ここに Ψ_S は、 $N+1$ 個の電子が1個の局在スピンと sd 相互作用しているときの exact な固有関数であり、 $W_S(N+1)$ はそのエネルギー固有値である。したがって、複素 ω 平面上での $K(\omega)$ の特異性をしらべることによって、スペクトル W_S に関する情報がえられる。ただし、あらゆる情報がえられるわけではなく、マトリックス・エレメント $\langle \Phi_0 | c\alpha | \Psi_S \rangle$ がゼロでないような部分だけにかぎられる。

さて、(2.4)を H_1 に関して摂動展開しよう。 H_1 を switch off しても、状態 Φ_0 は不変であるから、通常の公式により

$$K(k\alpha\beta t, k'\alpha'\beta' t') \\ = \langle \Phi_0 | T S(\infty, -\infty) c_{k\alpha}(t) a_{\beta}(t) a_{\beta'}^+(t') c_{k'\alpha'}^+(t') | \Phi_0 \rangle \quad (2.8)$$

ただし

$$S(t, t') = \exp \left[-i \int_{t'}^t H_1(t_1) dt_1 \right] \quad (2.9)$$

であり、オペレータはすべて相互作用表示で与えられているものとする。(2.8)の右辺は Wick の定理によって因数分解し、Feynman グラフで表示できる。その際、連結されたグラフだけがあらわれることに注意しておこう。実際、相互作用 H_1 はスピノンを新に作り出す能力はないので

$$\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle = 1 \quad \text{-----} \quad (2.10)$$

§ 3. Vertex Corrections

グラフで表示するばあい，自由電子および自由スピノンの propagator をそれぞれ実線・点線であらわす。Fourier 変換した表式は

$$\begin{aligned} G_0(\xi, \omega) &= [\omega - \xi + i0^+]^{-1} \\ g_0(\omega) &= [\omega + i0^+]^{-1} \end{aligned} \quad \text{-----} \quad (3.1)$$

したがって点線は，過去から未来の方向にのみ走る。また，すでに注意しておいたように， H_1 はスピンの数を保存するのであるから，(2.8)の右辺にあらわれるどのグラフにおいても， t' から t まで，連続して走るただ一本の点線があるだけである。

さて(2.8)の0次の項は

$$K^{(0)}(k\alpha\beta, k'\alpha'\beta'; \omega) = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} \delta_{kk'} R(\xi_k, \omega) \quad \text{-----} \quad (3.2)$$

を与える。ここに

$$\begin{aligned} R(\xi, \omega) &= i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} G_0(\xi, \omega - \omega_1) g_0(\omega_1) \\ &= \theta(\xi) \cdot [\omega - \xi + i0^+]^{-1} \quad \text{-----} \quad (3.3) \end{aligned}$$

であり， $\theta(\xi)$ は $\xi > 0$ のとき1， $\xi < 0$ のとき0となる。つまり $K^{(0)}(\omega)$ は，実数軸に沿って $\omega = 0$ から $\omega = D$ までの branch cut をもっており，これはいうまでもなく Fermi sea に inject した自由電子のスペクトルにほかならない。(2.8)の高次の項を考えに入れると，この branch cut の外に孤立した極があらわれうるのであって，このことは，inject された電子が局在スピンと束縛状態を形成することを意味する。

ところで，高次の項は self-energy correction と vertex correction とに分類されるが，さしあたり前者を無視しよう。なお，式を簡潔にす

るために, $K(k\alpha\beta, k'\alpha'\beta'; \omega)$ をひとつのマトリックス $K(\omega)$ の成分とみなす。たとえば (3.2) は対角マトリックス $K^{(0)}(\omega)$ を定義する。同様に, (2.8) の 1 次の項は, マトリックス記法で

$$K^{(1)}(\omega) = K^{(0)}(\omega) r K^{(0)}(\omega) \quad \text{-----} (3.4)$$

を与える。ここに r は次のように定義されたマトリックスである。

$$r(k\alpha\beta, k'\alpha'\beta') = - \left(\frac{J}{N} \right) (\sigma_{\alpha\alpha'} \cdot S_{\beta\beta'}) \quad \text{-----} (3.5)$$

ここですぐおもいつくことは, 高次の項のうち Fig. 1 であらわされるようなハシゴ型のものについて部分和をとることである。これは (3.4) のくり返しであるから, $K(\omega)$ の近似として

$$K(\omega) \cong [1 - K^{(0)}(\omega) r]^{-1} \cdot K^{(0)}(\omega) \quad \text{-----} (3.6)$$

がえられる。孤立特異点はマトリックス方程式 $1 = K^{(0)}(\omega) r$ で定められるわけである。あるいは固有関数 $\psi(\xi\alpha\beta)$ を導入して

$$(\xi - \omega) \psi(\xi\alpha\beta) \quad \text{-----} (3.7)$$

$$- (J\rho/N) \int_0^D d\xi' (\sigma_{\alpha\alpha'} \cdot S_{\beta\beta'}) \psi(\xi'\alpha'\beta') = 0$$

これは Yosida 理論 [1] の最低次でえられる永年方程式にはかならない。

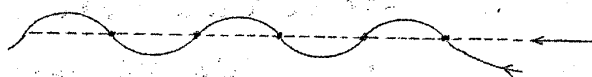


Fig. 1

近似 (3.6) は, 高密度電子ガスの分極率にたいする RPA 近似に対応するとみることできる。ところが, sd 相互作用のばあい, 近似 (3.6) は most divergent terms をとりつくしてはいないのである。たとえば, simple vertex r にたいする 1 次の補正は, グラフでかけば Fig. 2 であり, 式でかくと,

$$r^{(1)} = - \left(\frac{J}{N} \right)^2 \left[(\sigma \cdot S) + \frac{3}{4} \right] Z(\omega - \omega_1 - \omega_2 - i0^+) \quad \text{-----} (3.8)$$

s d 相互作用による束縛状態

ただし

$$Z(\omega) = i\rho \int_{-D}^D d\xi'' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega''}{2\pi} G_0(\xi'', \omega'' + \omega) g_0(\omega'')$$

$$= \rho \log \left[\frac{\omega - D}{\omega} \right] \quad (3.9)$$

であって, \log はたとえば主値をとるものとする。このように, 対数的特異性があらわれてくるので, 弱結合の極限といえども, vertex correction を無視するわけにいかない。

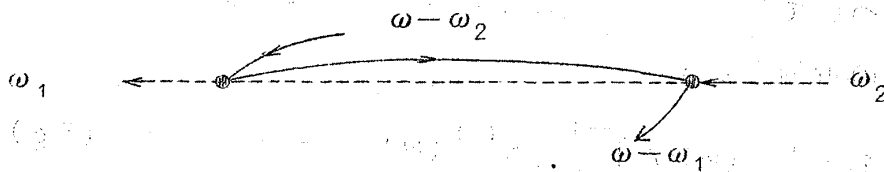


Fig. 2

一般的にいえば, simple vertex r と, そのあらゆる補正を加えあわせて four-vertex function がえられるわけであるが, 弱結合の極限では, その most divergent part が知られたらよい。そしてこの part は, 実は Abrikosov [5] がすでに計算しているのである。 r にたいする most divergent correction は, いわゆる parquet グラフ, つまり一対の実線, 点線を順次取去ることによって simple vertex に帰着させうるようなグラフであらわされる。いま問題になるのは, 互に平行に走っている一対の実線, 点線を切ることによってふたつの部分に分離してしまわない。という意味で既約な parquet グラフである。ここでは, r および既約な parquet グラフの総和を Fig. 3 のように箱で示すことにし, $I(\alpha\beta, \alpha'\beta'; \omega - \omega_1 - \omega_2 - i0^+)$ とかくことにしよう。

Abrikosov [5] により,

$$I(\omega) = - \left(\frac{J}{N} \right) \left[\left\{ 1 + \frac{J}{N} Z(\omega) \right\} (\sigma \cdot S) - \frac{3J}{4N} Z(\omega) \right]$$

$$\cdot \left[1 + \left(\frac{2J}{N} \right) Z(\omega) \right]^{-1} \quad (3.10)$$

いうまでもなく，分母を展開すると，1次の項は(38)を与える。

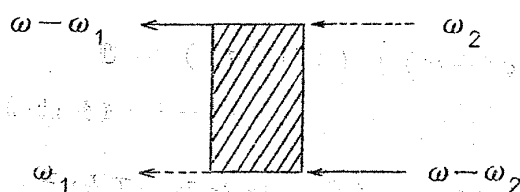


Fig. 3

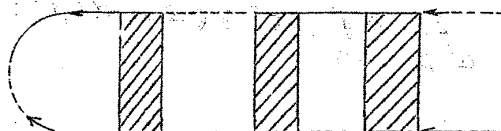


Fig. 4

さて，(3.4)の simple vertex r を I でおきかえよう。

$$\begin{aligned}
 & i^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{(2\pi)^2} G_0(\xi_k, \omega - \omega_1) g_0(\omega_1) \\
 & \quad \cdot I(\omega - \omega_1 - \omega_2 - i0^+) G_0(\xi_{k'}, \omega - \omega_2) g_0(\omega_2) \\
 & = R(\xi_k, \omega) I(\xi_k + \xi_{k'}, -\omega) R(\xi_{k'}, \omega) \text{-----} (3.11)
 \end{aligned}$$

マトリックス記法でかくと，(3.4)に most divergent vertex correction を加えたものとして

$$K^{(0)}(\omega) \Gamma_i(\omega) K^{(0)}(\omega) \text{-----} (3.12)$$

がえられる。マトリックス Γ_i の定義は

$$\begin{aligned}
 & \Gamma_i(k\alpha\beta, k'\alpha'\beta'; \omega) \\
 & = I(\alpha\beta, \alpha'\beta'; \xi_k + \xi_{k'}, -\omega) \text{-----} (3.13)
 \end{aligned}$$

そこで，Fig. 4 のように，Fig. 1 の r をすべて I でおきかえたハジゴ形グラフの和をとることにする。すると，most divergent vertex correction をすべてふくんだ表式

$$K(\omega) \cong [1 - K^{(0)}(\omega) \Gamma_i(\omega)]^{-1} K^{(0)}(\omega) \text{-----} (3.14)$$

がえられる。孤立特異点をきめる永年方程式は $1 = K^{(0)}(\omega) \Gamma_i(\omega)$ ，つまり

s d 相互作用による束縛状態

$$\begin{aligned}
 & (\xi - \omega) \psi(\xi \alpha \beta) \\
 & + \sum_{\alpha' \beta'} \rho \int_0^D d\xi' I(\alpha \beta, \alpha' \beta'; \xi + \xi' - \omega) \psi(\xi' \alpha' \beta') = 0
 \end{aligned}
 \tag{3.15}$$

これは Yoshimori [4] が発見した積分方程式と全く同じ形をもっている。
たとえば一重項状態で

$$\begin{aligned}
 & (\xi - \omega) \psi(\xi) + \frac{3J\rho}{2N} \int_0^D d\xi' \left[1 + \frac{3J}{2N} Z(\xi + \xi' - \omega) \right] \\
 & \cdot \left[1 + \frac{2J}{N} Z(\xi + \xi' - \omega) \right]^{-1} \psi(\xi') = 0
 \end{aligned}
 \tag{3.16}$$

束縛状態は $\text{cut}(0, D)$ の外，負の実軸にあらわれるはずであって，そこでは

$$\begin{aligned}
 Z(\xi + \xi' - \omega) &= \rho \log \left| \frac{\xi + \xi' - \omega - D}{\xi + \xi' - \omega} \right| \\
 &\cong \rho \log \left| \frac{D}{\xi + \xi' - \omega} \right|
 \end{aligned}$$

§ 4. Self-energy Corrections

(3.15) は Yoshimori 方程式と同じ形ではあるが，しかしまだ完全に後者と等価ではない。Yosida 理論 [1, 2] の永年方程式は， J のべき級数であらわされる，という意味でノーマルなエネルギー・シフトも考えに入れているからである。われわれの方法でいうと，このようなシフトは，いままで無視してきた self-energy correction にふくまれている。

あらゆる self-energy correction を加えると，propagator G_0 , g_0 は exact Green 関数 G , g に転化する。

ところで，§ 3 で考えたグラフはすべて skeleton グラフであるから，self-energy correction を加えるには，§ 3 にあらわれた G_0 , g_0 をすべて G , g でおきかえてやればよい。

さて，電子の exact Green 関数は，もともとの定義にまでさかのぼってかくと，

$$G(k\alpha t, k'\alpha' t') = \langle \Phi_0 | T C_{k\alpha}(t) C_{k'\alpha'}^+(t') | \Phi_0 \rangle \quad (4.1)$$

しかし， Φ_0 はスピノンの真空であり，ハミルトニアン H はこの真空からスピノンを作り出す能力がないのであるから，(4.1) は実は自由電子の Green 関数に帰着してしまう。つまり，一電子 propagator にたいする self-energy correction はないのである。このことは，点線が過去から未来の方向へ一方むきにだけ走り，したがって閉じたループを作りえないことに注意すれば，自明である。この結論は，Abrikosov [5] や，Nagaoka [6] の理論と一見矛盾するようであるが，実はそうではない。彼らは，局在スピンかすでに存在している，つまりわれわれの言葉でいえば，1個のスピンが存在している状態（(2.7) にあらわれた Ψ_0 ）に関して一電子 Green 関数を考えているのであって，これは (4.1) と別物である。

さて，スピノンに対しては self-energy correction が存在する。exact Green 関数は

$$g(t-t') = \langle \Phi_0 | T A_\beta(t) A_\beta^+(t') | \Phi_0 \rangle \quad (4.2)$$

その Fourier 変換を

$$g(\omega) = [\omega - \Omega(\omega)]^{-1} \quad (4.3)$$

とかくと， $\Omega(\omega)$ がスピンの proper self-energy part である。(4.2) は $t < t'$ で消えるから， $g(\omega)$ は複素 ω 半面の上半面で正則である。いま Φ_0 の代りに

$$\Phi_\beta = a_\beta^+ \Phi_0 \quad (4.4)$$

を用いよう。これはふつうの方式で sd 相互作用を摂動として扱うばあいの，非摂動状態にほかならない。(4.4) をつかうと，(4.2) は

$$g(t) = \theta(t) \cdot \langle \exp[i(E_0 - H)t] \rangle \quad (4.5)$$

s d 相互作用による束縛状態

とかける。ただし $E_0 = E_0(N)$ であり、 $\langle \dots \rangle$ は状態 (4.4) に関する期待値をあらわす。

(4.5) の Fourier 変換は

$$g(\omega) = \langle \frac{1}{\omega + i0^+ - (H_0 - E_0 + H_1)} \rangle \quad (4.6)$$

この分数オペレータを H_1 についてベキ展開し、(4.3) と比較すると、

$$\Omega(\omega) = \langle H_1 \rangle + \langle H_1 D(\omega) H_1 \rangle + \langle H_1 D(\omega) H_1 D(\omega) H_1 \rangle + \dots \quad (4.7)$$

ただし

$$D(\omega) = \frac{1 - P}{\omega + i0^+ - (H_0 - E_0)} \quad (4.8)$$

であり、 P は状態 (4.4) への射影を意味する。

Yosida [2] が示したように、 $\Omega(\omega)$ は $\omega = 0$ でも有限な値

$$\Delta E = \langle H_1 \rangle + \langle H_1 \left(\frac{1 - P}{E_0 - H_0} \right) H_1 \rangle + \dots \quad (4.9)$$

をもち、且つ差

$$\Delta \Omega(\omega) = \Omega(\omega) - \Omega(0) \quad (4.10)$$

は、われわれがいま問題にしているよりも低い対数的特異性しかもたない。そこで (4.10) を無視すると、

$$g(\omega) \cong g_0(\omega - \Delta E) \quad (4.11)$$

(4.9) はふつうの Rayleigh - Schrödinger 法でえられるエネルギー・シフトにほかならない。

このような定数だけの self-energy は、次のようにくりこみ操作で消してしまうことができる。つまり、もともとのハミルトニアンに

$$\tilde{H} = H + \sum_{\beta} \Delta E \frac{a_{\beta}^{\dagger}}{a_{\beta}} \quad (4.12)$$

と counter term をつけ加えておき，その代り sd 相互作用によってあらわれてくるスピノンの self-energy のうち，定数項を無視するのである。したがって，Heisenberg オペレーターは

$$\begin{aligned}\tilde{A}_\beta(t) &= e^{iHt} a_\beta e^{-iHt} \\ &= A_\beta(t) e^{-i\Delta E t}\end{aligned}$$

で与えられることになり，(2.4)に対応するものは，

$$\tilde{K}(t-t') = K(t-t') e^{-i\Delta E(t-t')}$$

したがって Fourier 変換にたいし

$$\tilde{K}(\omega) = K(\tilde{\omega})$$

ただし

$$\tilde{\omega} = \omega - \Delta E \quad \text{-----} (4.12)$$

こうして，(3.15)の ω が $\tilde{\omega}$ でおきかえられ，Yoshimori 方程式と完全に一致することになる。

§ 5. Conclusion

このノートでは，Green 関数とその摂動展開を用いて，Yosida, Okiji, Yoshimori の理論を reformulate した。束縛状態は Green 関数の孤立特異点としてあらわれる。この特異点を決める永年方程式は，most divergent vertex correction と regular self-energy correction をひろい集めるとき，Yoshimori 方程式と一致する。

ここにのべた方法を有限温度に拡張することは簡単である。しかし，電子の散乱マトリックスとか，比熱とかの物理量を求めようとするとき，ここに考えた二粒子 Green 関数 K だけでは情報不足であって，すくなくとも三粒子 Green 関数を考える必要がある。これについては，別の機会に論ずるとしよう。

おわりに，有益な討論とコメントをいただいた芳田，吉森，興地，田中，川

s-d相互作用による束縛状態

村，黒田の諸氏に感謝をのべておきたい。

文 献

- [1] K.Yosida, Phys. Rev. 147 (1966) 223.
- [2] K.Yosida, Prog. Theor. Phys. 36 (1966) 875.
- [3] A.Okiji, Prog. Theor. Phys. 36 (1966) 714.
- [4] A.Yoshimori, to be published in Phys. Rev.
- [5] A.A.Abrikosov, Physics 2 (1965) 5.
JETP 53 (1967) 1078.
- [6] Y.Nagaoka, Phys. Rev. 138 (1965) 1112 A.